2017年6月16日　統計数理研究所　オープンハウス

位相的データ解析への機械学習的アプローチ

福水　健次　　数理・推論研究系　教授　　（東北大・AIMR・平岡裕章先生，草野元紀氏との共同研究）

■ 位相的データ解析(TDA)

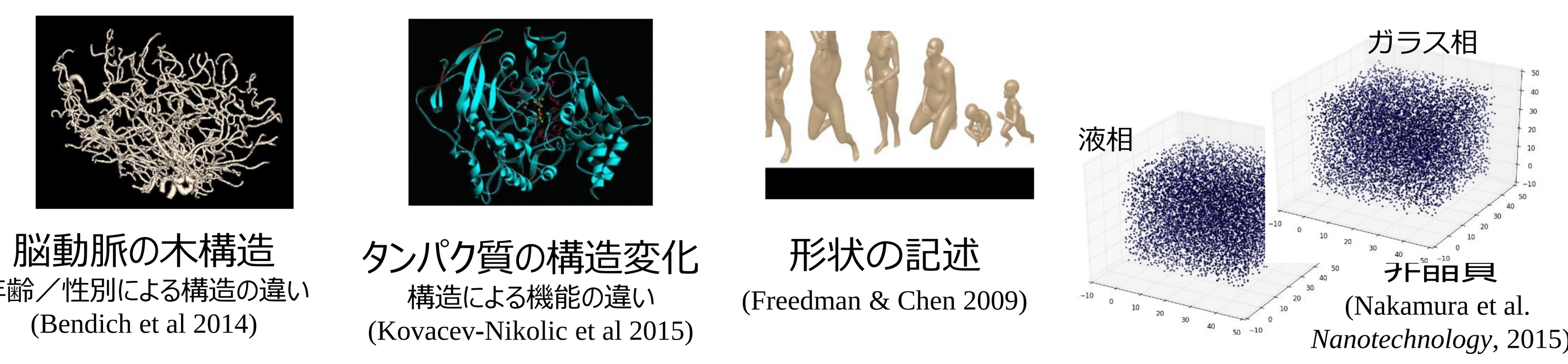
データの位相的・幾何的情報を抽出するための新しい方法論

キーテクノロジー ＝ パーシステントホモロジー

(Edelsbrunner et al 2002; Carlsson 2005)

- すでに様々な応用がなされている

脳科学　生化学　コンピュータビジョン　物質・材料科学



脳動脈の木構造 年齢／性別による構造の違い (Bendich et al 2014)

タンパク質の構造変化 構造による機能の違い (Kovacev-Nikolic et al 2015)

形状の記述 (Freedman & Chen 2009)

(Nakamura et al. *Nanotechnology*, 2015)

- ホモロジー群

位相的不変量

図形は，三角形（単体）の集まりで記述する ⇒ 代数的な扱い．

≅　代数的操作　位相的不変量

：1次元ホモロジー群の生成元　　点，線，三角形の集まりとそのつながり具合を記述

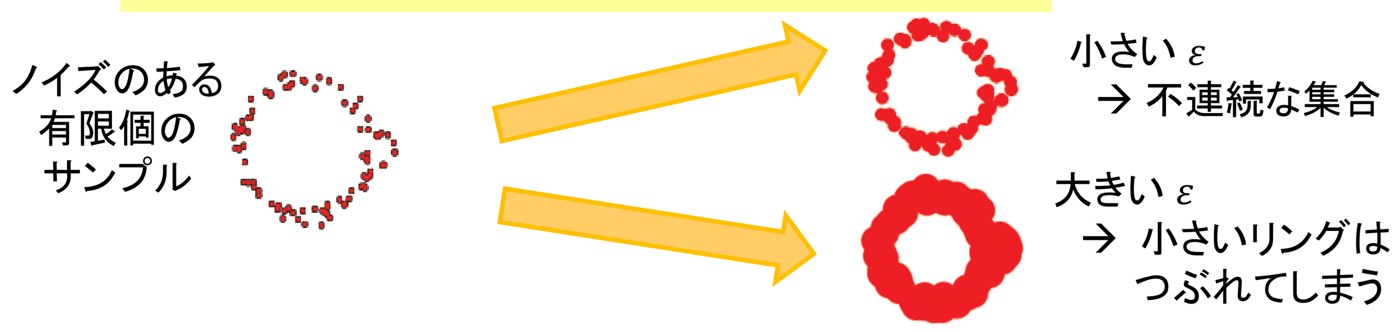
- ホモロジー群：位相的不変量として「穴」を群として表す．
  - 0次元＝連結成分　$H^0(X)$
  - 1次元＝リング　$H^1(X)$
  - 2次元＝空洞（cavity) $H^2(X)$　　・・・

ホモロジー群の生成元：連続に移り合えない「穴」の代表元

- 統計的推論における位相情報の利用

有限データからの位相の特定は，それほど容易ではない．

半径 ε の球（ε - ball)により真の構造を捉えよう



- パーシステントホモロジー　(Persistence Homology，PH)

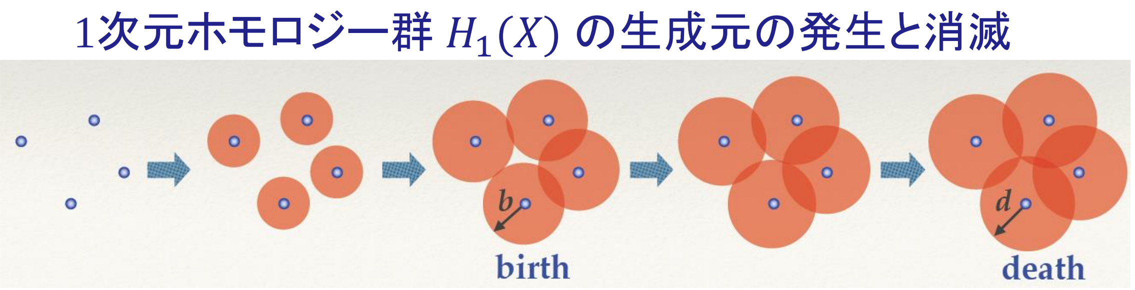
すべての ε を同時に考える．

- 点集合　$X = \{x_i\}_{i=1}^m \subset \mathbf{R}^d$，　$X_\varepsilon \coloneqq \cup_{i=1}^m B_\varepsilon(x_i)$
- 位相空間の増大列

$\mathfrak{X}:\ X_{\varepsilon_1} \subset X_{\varepsilon_1} \subset \cdots \subset X_{\varepsilon_L}\quad (\varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \cdots < \varepsilon_L)$

- 異なるパラメータ $\varepsilon_i < \varepsilon_j$ に対し，ホモロジー生成元の関係づけが可能（新たに発生，継続，消滅）．　(厳密な定義はCarlsson 2009; 平岡2013)
- 各生成元の発生と消滅時刻が定まる．

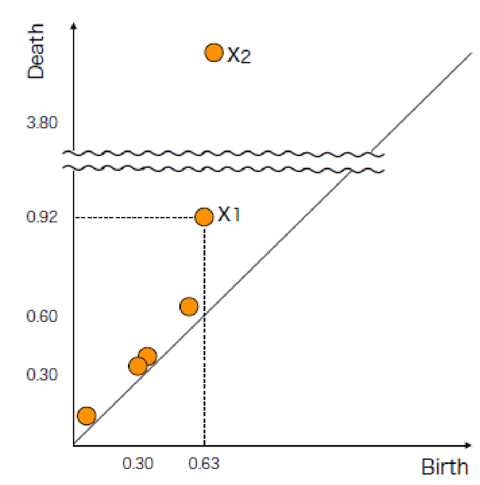
1次元ホモロジー群 $H_1(X)$ の生成元の発生と消滅



- パーシステント図（PD，生成，消滅の表現）

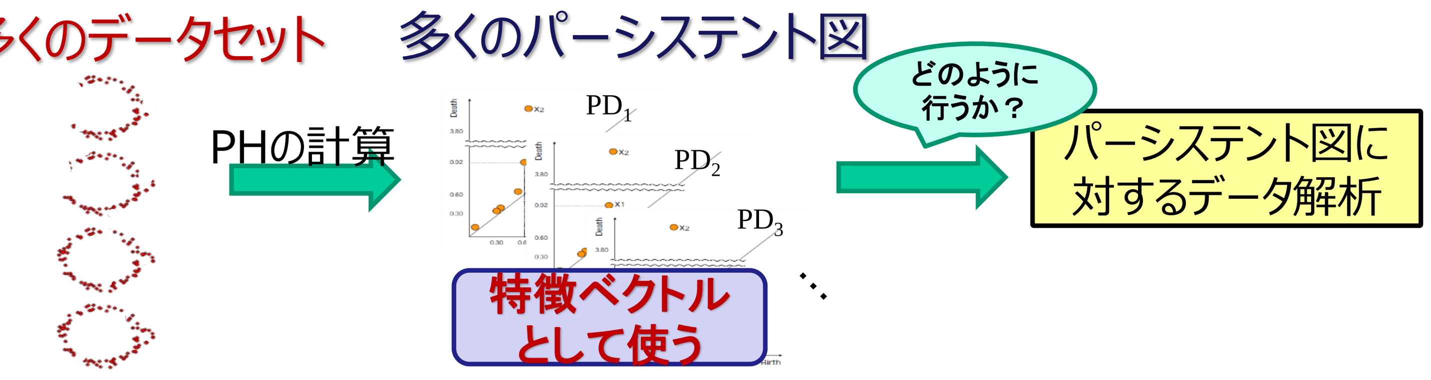
各PH生成元の発生(b)，消滅(d)時刻を，2Dグラフ上の点 (b,d) で表したもの．

複雑な幾何的データの特徴ベクトル／記述子として使おう！



■カーネル法によるパーシステント図のベクトル化

- PDのデータ解析



- カーネル法によるベクトル化

PD ＝ 離散測度と思う　$\mu_D \coloneqq \sum_{x_i\in D} \delta_{x_i}$　　$D = \{x_i\}$ 生成・消滅時刻

PDのRKHSへの埋め込み

$\mathcal{E}_k:\quad \mu_D \mapsto \int k(\cdot,x)d\mu_D(x) = \sum_i k(\cdot,x_i)\quad \in H_k,$

e.g. $\sum_i \delta_{x_i} \mapsto \sum_i \exp\left(-\frac{\|y-x_i\|^2}{2\sigma^2}\right)$

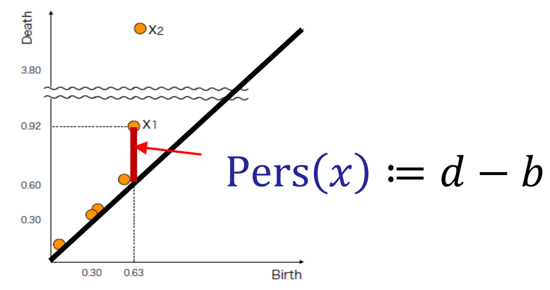
再生核ヒルベルト空間の元として表現　→ PD間の距離，内積(類似度)

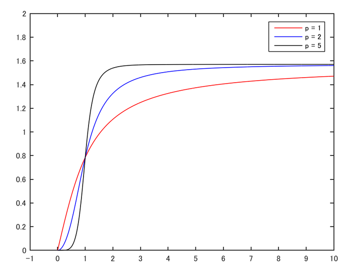
- Persistence Weighted Gaussian Kernel（Kusano, F.ukumizu, Hiraoka ICML2016）

アイデア：対角線に近い生成元はノイズの可能性が高い→重みを小さく

$$k_{PWG}(x,y) = w(x)w(y)\exp\left(-\frac{\|y-x\|^2}{2\sigma^2}\right)$$

- 重み関数 $w(x) = w_{C,p}(x) \coloneqq \arctan(C\,\mathrm{Pers}(x)^p)$　　$(C,p>0)$





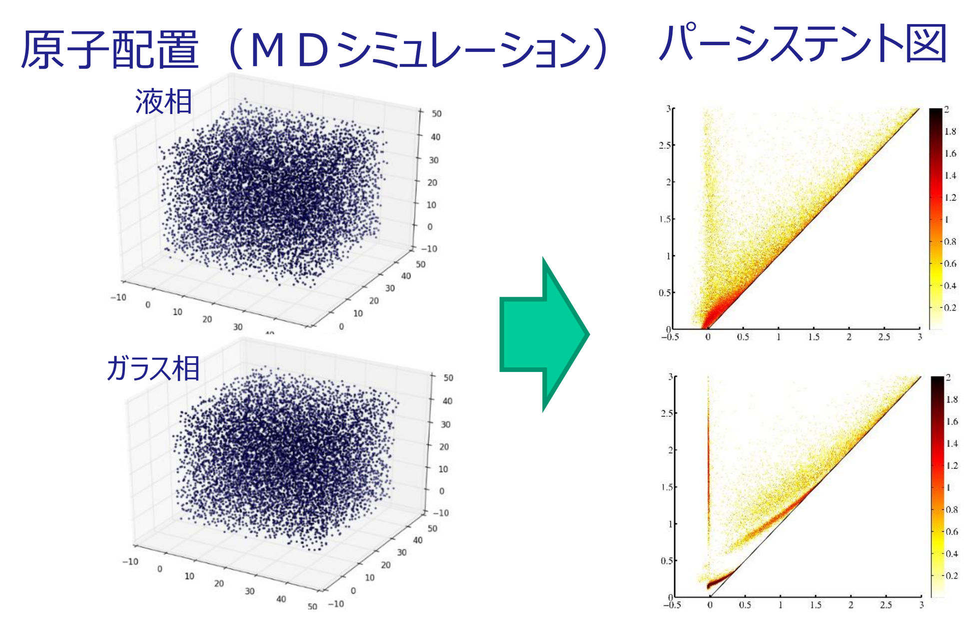
- 安定性定理が成立(Kusano et al ICML2016) 点集合がHausdorff距離の意味で微小に変化したとき，そのベクトル表現もRKHSの距離で微小にしか動かない．

■物質科学への応用

シリカ(SiO2)の液相-ガラス相転移

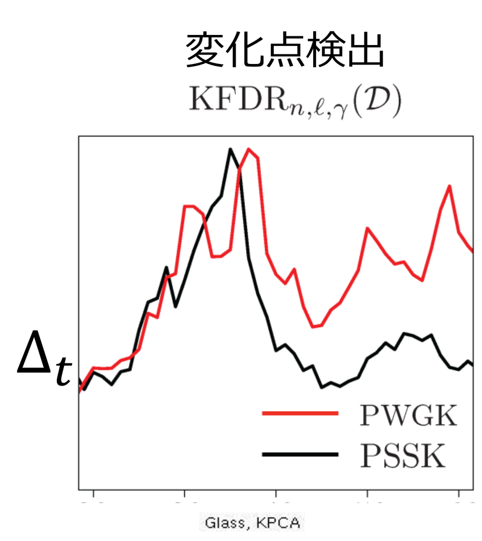
- 目的:　液相からガラス相に転移する温度を特定したい．
- データ:　SiO2分子動力学（MD）シミュレーション (Nakamura et al 2016 PNAS)

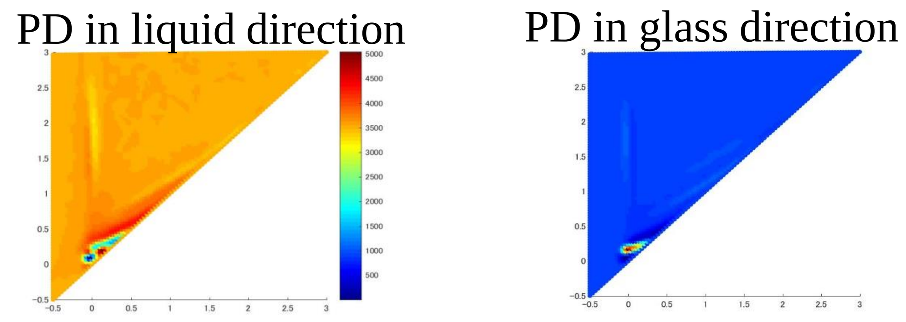
- 温度を変えて80セットの3次元原子配置データ（スナップショット）を取得
- 原子の3次元配置データから，PDを計算．

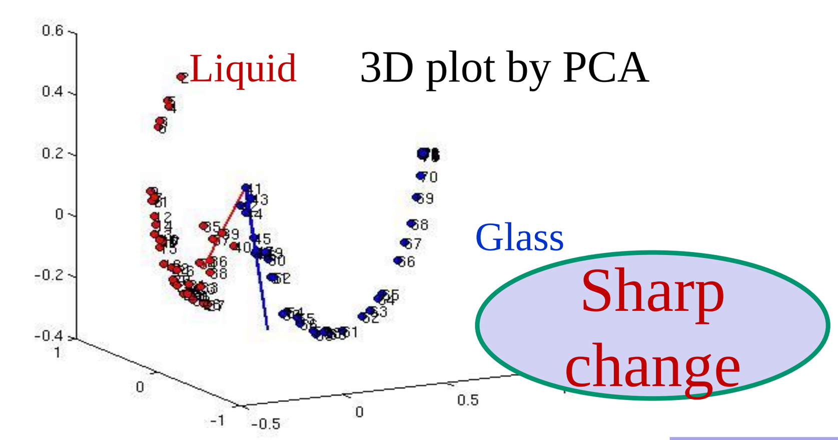


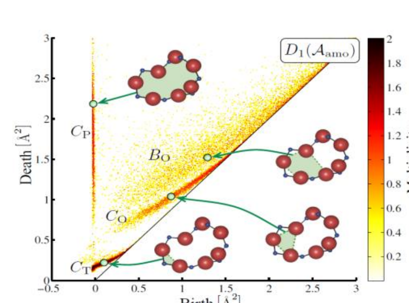
- 提案法：PDのベクトル化に対する変化点検出問題として転移点を推定

検出された変化点 = 3100K
物理的方法: [2000K, 3500K]









(Nakamura et al *Nanotechnology* 2015

参考文献

Kusano, G., Fukumizu, K., Hiraoka, Y. (2016) Persistence weighted Gaussian kernel for topological data analysis. *Proc. ICML2016*